

2010 年度 修士論文要旨

第一原理計算によるペロブスカイト型酸化物の電子状態

-BaTiO₃、SrTiO₃、PbTiO₃の相互比較-

関西学院大学大学院理工学研究科

物理学専攻 寺内研究室 西田隆彦

近年、メモリーの絶縁膜として強誘電体薄膜が注目されているが、その薄膜化における強誘電性の消滅が問題視されている。そこでより薄膜化可能な強誘電体材料の開発が必要となってくるが、この目的を達成する為の一つは、自発分極が薄膜化によって消滅する過程の詳細を知る必要がある。過去の研究¹⁻⁴⁾では、様々な条件化による BaTiO₃ のクラスタとその周りに点電荷を配置することで結晶を近似して強誘電性消滅の研究、解析を行ってきた。そこで本研究では、第一原理計算である DV-X α 分子軌道法を用いて代表的なペロブスカイト型強誘電体である BaTiO₃、PbTiO₃、SrTiO₃ の電子状態を様々な条件下で計算し、膜厚変化に対する強誘電性の変化を解析した。

今回、計算モデルとして、A₈Ti₇O₆ (A=Ba,Pb,Sr) クラスタの周りに点電荷を配置することで結晶をモデル化し、また電極をつけた状態の膜厚変化に対する強誘電性の変化を解析した。

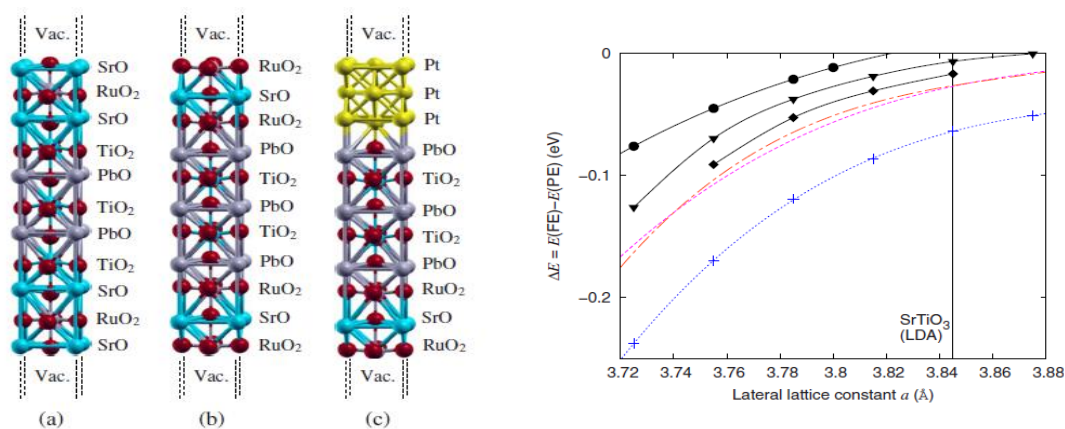


Figure1. Ferroelectric stability of SrRuO₃/PbTiO₃/SrRuO₃ capacitors. Energy difference ΔE per PbTiO₃ perovskite unit cell between the FE and PE state as a function of the in-plane lattice constant a . Open and closed symbols are for TiO₂- and PbO-terminated films, respectively (circles, $m=2$; triangles, $m=4$; diamonds, $m=6$; pluses, $m=\infty$, i.e. bulk).

- 1) K. Ishizumi, H. Kawanishi, R. Nakao, I. Takahashi, H. Terauchi, Y. Hayafuji, and K. Miura. Jpn. J. Appl. Phys. **45** (2006) 2656.
- 2) R. Nakao, K. Ishizumi, I. Takahashi, H. Terauchi, Y. Hayafuji, and K. Miura. Appl. Phys. Lett. **86** (2005) 222901.
- 3) 〇北川昂人、河西宏紀、石角圭佑、高橋功、寺内暉、早藤貴範；第 54 回応用物理学関係連合講演会(2007).
- 4) 〇笠原直也、北川昂人、石角圭佑、宮田征典、高橋功、寺内暉、早藤貴範；第 55 回応用物理学関係連合講演会(2008).